



TITLE:

8.一次元extended Hubbardモデルにおける
Hartree-Fock密度波状態とそのlong range
orderのソリトンとポーラロン(京都大学大
学院理学研究科物理学第一専攻,修士論文題
目・アブストラクト(1988年度))

AUTHOR(S):

桶谷, 真平

CITATION:

桶谷, 真平. 8.一次元extended HubbardモデルにおけるHartree-Fock密度波状態とそのlong range orderのソリトンとポーラロン(京都大学大学院理学研究科物理学第一専攻,修士論文題目・アブストラクト(1988年度)). 物性研究 1989, 53(1): 107-108

ISSUE DATE:

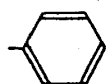
1989-10-20

URL:

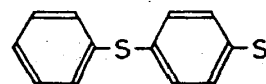
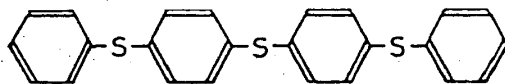
<http://hdl.handle.net/2433/93827>

RIGHT:

sulfide)に近い分子構造をもつ新しく合成された有機分子 Tri-PS



と Tetra-PS



について我々はその単結

晶育成に成功した。PPSにおいてはドーピングによって電気伝導率が向上することが確かめられているが、ドーパントが結晶内のどのような位置にどのようなプロセスで入るのかはまだよくわかっていない。また、有機結晶の結晶成長や格子欠陥の問題に対しては、各分子間の結合力が主として Van der Waals 力であることから Packing の考え方をを用いて考察することが有力な指針になっている。

本研究の最終目的は、オリゴマー単結晶を用いてドーパントが結晶構造や格子欠陥に及ぼす影響を上記の指針に基づきあきらかにしようとするものである。Tri-PS 及び Tetra-PS 単結晶は室温で n-hexane 溶液からの蒸発法で育成した。得られた Tri-PS 単結晶は、空間群 $P2_1/c$ に属する $\{010\}$ に発達した板状晶に成長し、X線トポグラフィで格子欠陥が観察できるほどの完全性を持つ。さらに、構造解析の結果、PPS と晶系は異なっているが、分子構造、隣あっている分子との Packing は PPS に似ていることがわかった。従って Tri-PS 単結晶が PPS のモデル結晶として適当なものであると結論できる。トリマーには対称中心があるが、テトラマーにはない。この違いは結晶構造やモルフォロジーの違いに結びつく。Tetra-PS 単結晶の晶系は斜方晶であることから、モノマー数の偶奇によって結晶の晶系が変わることが予想される。

8. 一次元 extended Hubbard モデルにおける Hartree-Fock 密度波状態とその long range order のソリトンとポーラロン

桶谷 真平

一次元等間隔 half-filled extended Hubbard モデルの電子構造を Hartree-Fock (HF) 近似を用いて解く。そして、格子の 2 倍周期の密度波 (CDW, SDW, BOW, SBOW など) 状態の解析的近似表現を求める。

密度波の HF energy, ギャップの U, V 依存性を調べると、SDW, CDW が基底状態となることがわかる。ただし、 U, V はそれぞれ同一サイト上、隣接サイト間での Coulomb 相互作用の大きさを表わすパラメータである。

各密度波の HF energy の交わる境界を求め、 $U-V$ 平面内での energy 大小関係を求める。

Weak coupling limit は U, V の小さい狭い領域でのみ成立する。

SDW, CDW の order parameter のソリトン, ポーラロンの計算をする。その結果, ソリトンは, $V = 0$ (Hubbard モデル) では pure amplitude 的で, $V > 0$ では amplitude-phase 的であることがわかる。また, nearly pure phase 的になる領域はない。

ソリトン, ポーラロンの拡がり, $E_{\text{SDW}} = E_{\text{CDW}}$ となる HF 相転移線上で最大となる。また, U が小さくなると拡がりが増え, U が大きくなると拡がり減る。

ソリトンの構造は, 例えば荷電ソリトンは上記の相転移線上では, SDW 基底状態の場合, SDW の位相の反転とそれに伴う振幅のくぼみ, 局在した交代する SBO, 局在した非交代の net CD, BO からなる。CDW 基底状態の場合, CDW の位相の反転とそれに伴う振幅のくぼみと局在した交代 BO からなり, SD と SBO はない。これら 2 種の異なる構造の荷電ソリトンが存在するが, それらの energy spectra は全く等しくなる。

ポーラロンは SD (CD) のくぼみと局在した交代する CD (SD) を持ち, また中心でくぼんだ局在した BO と SBO を持つ。相転移線上でポーラロンは荷電 $1/2$, スピン $1/4$ の 2 つの部分に分裂する。この半ポーラロンは SDW と CDW のブロックの境界をなしている。ポーラロンの分裂により SDW と CDW のブロックが混在する状態がつけられる。

9. 孤立 Se-Te 混合鎖の光学的性質

久 貝 裕 一

2 配位共有結合で結ばれた Se や Te の鎖状構造, および半導体的性質は, 隣接する鎖間の相互作用に強く支配される。我々は, モルデナイト結晶の直径約 6.7 \AA の一次元細孔に Se, Te およびその混合系を閉じ込め, 隣接鎖間相互作用を取り除いた孤立カルコゲン鎖の物性について検討を加えた。

試料は脱水した Li 型モルデナイトと, Se や Te, またはその混合体の蒸気と共存させることにより作製した。Se を吸蔵させたモルデナイトはだいたい色をしているが, Te 濃度を増すと茶色に変色していき, Te を吸蔵させたものでは黒褐色になる。これらの試料について, 室温で光音響分光 (PAS) の測定を行なった。Se や Te の内蔵量に比例して光吸収量が変化することを利用し, PA 信号の強度から光吸収係数 α の相対値を求め, 光学ギャップ E_g を決定した。孤立 Se 鎖の E_g は約 2.3 eV で, 結晶 Se の E_g (1.8 eV) より大きい。孤立 Te 鎖の E_g は約 1.7